



Estimation des paramètres de modèles pour la digestion anaérobie

Ricardo Martinez

► To cite this version:

Ricardo Martinez. Estimation des paramètres de modèles pour la digestion anaérobie. [Rapport de recherche] RT-0284, INRIA. 2003, pp.44. inria-00069894

HAL Id: inria-00069894

<https://inria.hal.science/inria-00069894>

Submitted on 19 May 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Estimation des paramètres de modèles pour la digestion anaérobie

Ricardo MARTINEZ

N° 0284

Juillet 2003

THÈME 4

 *apport
technique*

Estimation des paramètres de modèles pour la digestion anaérobie

Ricardo MARTINEZ

Thème 4 — Simulation et optimisation
de systèmes complexes
Projet Comore

Rapport technique n° 0284 — Juillet 2003 — 44 pages

Résumé : La finalité de ce travail a été d'estimer de la meilleure manière possible des paramètres de différents modèles sur la respiration anaérobie. Dans un premier temps nous présentons les bases qu'on utilise pour construire les modèles du procédé biochimique. Puis nous faisons une analyse qualitative des modèles les plus connus sur le sujet.

Dans un deuxième temps nous avons suggéré différents modèles, afin de mieux estimer les paramètres du modèle initial. Nous avons mis au point un programme d'estimation des paramètres, et à l'aide des simulations, nous avons validé les différents modèles.

Puis nous avons obtenu des résultats pratiques avec des données réelles fournies par le projet AMOCO.

Finalement nous suggérons des modèles alternatifs, ainsi que différentes procédures à essayer pour améliorer notre estimation des paramètres.

Mots-clés : digestion anaérobie, bioprocédés, estimation de paramètres, modèles dynamiques

Parameter estimation for bioreactors models

Abstract: We describe dynamical models for anaerobic digestion, and try to estimate the parameters of these models with experimental data on AMOCO project.

Key-words: anaerobic digestion, bioprocess, parameter estimation, dynamical models

Table des matières

Introduction	4
1 Modèles dynamiques sur la Digestion Anaérobie	5
1.1 Modèle général du bioréacteur	6
1.2 Modèle pour la croissance des bactéries anaérobies dans le chimostat M1 . .	6
1.2.1 Points d'équilibre	8
1.2.2 Stabilité ou Instabilité locale	10
1.2.3 Plans de phase	12
1.3 Modèle réduit avec changement de variable, MR	14
1.3.1 Points d'équilibre	14
1.3.2 Plan de phase	16
1.4 Variation du modèle M1H	18
1.4.1 Points d'équilibre	18
1.4.2 Stabilité ou Instabilité locale	20
1.4.3 Plan de phase	21
2 Estimation des paramètres	24
2.1 Données expérimentales	25
2.2 Modèle M1	25
2.3 Modèle simplifié MS1	26
2.3.1 Résultats pour MS1	28
2.3.2 Résultats du programme en simulation pour MS1	28
2.3.3 Résultats avec les données réelles d'AMOCO pour MS1	32
2.3.4 Analyse des Résultats	33
2.4 Modèle simplifié MS2	36
2.4.1 Résultats pour MS2	37
2.4.2 Résultats du programme en simulation pour MS2	37
2.5 Modèle MX	40
2.5.1 Résultats pour MX	41
2.6 Modèles alternatifs	42
Conclusion	43

Introduction

La finalité de ce travail a été d'estimer de la meilleure manière possible des paramètres de différents modèles sur la respiration anaérobie.

Dans un premier temps nous présentons les bases qu'on utilise pour construire les modèles du procédé biochimique. Puis nous faisons une analyse qualitative des modèles les plus connus sur le sujet.

Dans un deuxième temps nous avons suggéré différents modèles, afin de mieux estimer les paramètres du modèle. Nous avons fait la mise au point d'un programme d'estimation des paramètres, et à l'aide des simulations, nous avons validé les différents modèles.

Puis nous avons obtenu des résultats pratiques avec des données réelles fournies par le projet AMOCO.

Finalement nous suggérons des modèles alternatifs, ainsi que différentes procédures à essayer pour améliorer notre estimation des paramètres.

Ce rapport décrit les résultats de première année de thèse, encadrée par O. Bernard et J-L. Gouzé.

1 Modèles dynamiques sur la Digestion Anaérobie

La modélisation des procédés biochimiques est basée, comme la plupart des modèles en biologie, sur des lois empiriques. Notre cas, la digestion anaérobie, n'échappe pas à cette particularité. C'est pour cela, que nous essayerons de donner les généralités que nous devons prendre en compte pour l'élaboration d'un modèle de ce type. Nous citerons ainsi, les propriétés générales pour bien faire un modèle biochimique:

- Cohérent: La qualité et structure du modèle doivent correspondre à l'objectif pour lequel le modèle a été construit.
- Respecter les règles physiques et chimiques telles que la conservation de la matière (bilan de masse), l'électroneutralité des solutions, etc.
- Description du schéma réactionnel du procédé biochimique (description au niveau macroscopique de l'ensemble des réactions biologiques et chimiques).

En suivant les propriétés antérieures nous construirons la démarche générale à suivre afin de construire des modèles sur la digestion anaérobie. Voici notre problème:

Problème : Nous avons un procédé de traitement de l'eau utilisant des bactéries anaérobies qui dégrade la matière organique.

Ce procédé est de nature très complexe car il met en jeu un grand nombre de populations bactériennes.

En plus, nous devons prendre en compte les considérations expérimentales liées à cette problématique, qui sont: le bioréacteur de culture des bactéries est infiniment mélangé (CSTR) et le mode de fonctionnement est continu, c'est à dire du type chémostat.

Une fois le problème bien défini, nous pouvons établir le but de notre modèle, qui est: arriver à mieux comprendre le bioprocédé, puis faire l'estimation des paramètres à partir des données expérimentales.

Une fois la cohérence du modèle acquis, nous regardons les caractéristiques chimiques et biologiques particulières. Dans notre cas, "les bactéries anaérobies", le comportement dynamique des différents composants de la réaction biologique découle directement de l'expression des bilans de matière (qui exprime la variation de la quantité d'un composé comme égale à la somme de ce qui est produit ou apporté, diminué de ce qui est consommé ou soutiré) [Dochain 2001].

Ainsi, à partir du schéma réactionnel, nous pouvons directement obtenir le modèle de bilan de matière. Autrement dit, le schéma réactionnel conduit à des équations qui décrivent de manière équivalente la répartition de la matière dans le bioréacteur [Bastin 1990].

1.1 Modèle général du bioréacteur

Voici le système des équations du modèle général du bioréacteur que nous utiliserons pour la construction de nos modèles.

$$\frac{d\xi}{dt} = Kr(\cdot) + D(\xi_{in} - \xi) - Q(\xi) \quad (1)$$

où:

ξ	Vecteur des variables d'état du processus
K	Matrice des rendements où coefficients stoechiométriques
$r(\cdot) = \psi(\cdot)\phi(\cdot)$	Vecteur des vitesses de réaction
ξ_{in}	Vecteur des éléments entrant dans le réacteur
$Q(\xi)$	Terme d'échanges gazeux entre la phase gazeuse et la liquide
$D = \frac{*Q_{in}}{V} = \frac{*Q_{out}}{V}$	Taux de dilution

$\psi(\cdot)$ et $\phi(\cdot)$ sont deux fonctions, la première connue et la deuxième inconnue.

Avec l'information suivante:

- le vecteur des paramètres: θ ,
- les entrées: $u = g(\xi, t, \theta)$,
- les sorties: $y = h(\xi, t, u, \theta)$,
- et la condition initiale ξ_0 .

***note:** Nous avons pris les taux d'entrées et de sorties égaux: $Q_{out} = Q_{in}$

Ce système matriciel (1) nous résume la description du schéma réactionnel du procédé en respectant les règles physiques et chimiques, dans ce cas le bilan de masse. [Dochain 2001]

1.2 Modèle pour la croissance des bactéries anaérobies dans le chémostat M1

En prenant notre problème et les considérations faites dans la section antérieure, nous pouvons re-écrire ceci de la manière suivante:

“Nous avons un réservoir de nutriment ou substrat S_{in} que nous versons à un certain taux D dans un chémostat, d'une culture de bactéries qui ont une densité de population X à chaque instant t . Nous avons le volume constant dans la chambre car le même taux D qui est utilisé pour verser le nutriment est aussi utilisé pour le retirer. La population de bactéries a un taux de consommation de nutriment k et sa vitesse de croissance est $\mu(S)$, où S est le substrat ou nutriment dans le chémostat.

Ici nous nous limitons à considérer le cas moins complexe avec une seule population bactérienne. Nous supposons alors, que la dynamique du système peut être résumée par une

seule étape: d'acidogénèse. Au fur et à mesure de cette étape les bactéries acidogènes se dégradent à vitesse $r(\cdot)$ le substrat S .

Voici les hypothèses utilisées afin de construire notre modèle:

- La chambre de culture est CSTR avec le mode de fonctionnement chémostat.
- Le taux de croissance des bactéries $r(\cdot)$, ne dépend que de S .
- La croissance se fait en une seule étape, d'acidogénèse, $S \rightarrow X$, absorption et croissance sont proportionnelles.
- Le taux de croissance sera de type Monod, afin de représenter un modèle avec saturation.

En prenant le principe du bilan de masse, les hypothèses antérieures et l'équation générale du bioréacteur, (1), nous pouvons définir nos vecteurs correspondants: variables du processus, les coefficients stoechiométriques, la vitesse de réaction et les éléments entrants, respectivement:

$$\xi = \begin{pmatrix} S \\ X \end{pmatrix}, K = \begin{pmatrix} -k \\ 1 \end{pmatrix}, \xi_{in} = \begin{pmatrix} S_{in} \\ 0 \end{pmatrix}, r(\cdot) = \mu(S)X \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

avec $Q(\xi) = 0$ et nous remplaçons ces vecteurs dans le modèle général, eq.(1) avec un taux de dilution D , en obtenant ainsi le modèle différentiel M1:

$$M1 \begin{cases} \frac{ds}{dt} = \dot{S} = D(S_{in} - S) - k\mu(S)X \\ \frac{dx}{dt} = \dot{X} = \mu(S)X - DX \end{cases} \quad (2)$$

Ce modèle présente les entrées u , la sortie y , la condition initiale ξ_0 et θ le vecteur des paramètres.

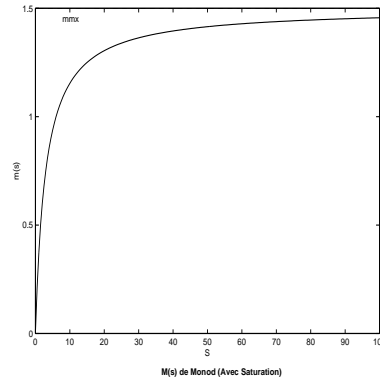
$$u = \begin{pmatrix} D \\ S_{in} \end{pmatrix}, y = \begin{pmatrix} S \end{pmatrix}, \theta = \begin{pmatrix} k \\ \mu_{mx} \\ k_s \end{pmatrix}, \xi_0 = \begin{pmatrix} S_0 \\ X_0 \end{pmatrix},$$

où:

- X = La densité de population des bactéries
- D = Le taux de dilution correspondant
- S = La concentration de nutriment dans la chambre de culture
- S_{in} = La concentration de nutriment qui vient du réservoir
- k = Le taux de consommation de nutriment

Soit μ la fonction de croissance de type Monod [Monod 1935]:

$$\mu(S) = \mu_{mx} \frac{S}{S + k_s} \quad (3)$$

FIG. 1 – *Fonction croissance de Monod*

où μ_{mx} est le taux de croissance maximal et k_s est la constante de saturation. Voici le graphique de la vitesse de croissance des bactéries:

Nous pouvons constater, que dans la courbe du modèle Monod, la consommation de nutriment est croissante si la quantité de nutriment n'est pas excessive, mais quand il arrive à une certaine limite, le taux de reproduction des bactéries arrive à un maximum μ_{mx} , au dessus duquel il ne peut plus passer n'importe quelle quantité de nutriment. Afin d'analyser le modèle antérieur nous ferons l'analyse suivante:

- Trouver les points d'équilibre
- Établir leur stabilité ou leur instabilité local
- Regarder leur stabilité globale.
- Tracer les plans de phase et les trajectoires au cours du temps dans les différentes conditions initiales.

1.2.1 Points d'équilibre

Afin d'obtenir les points d'équilibre du système antérieur on cherchera le point où la dérive correspondante est égale à 0, c'est à dire où la fonction correspondante est constante.

Dans l'équation \dot{X} du M1,(1), nous avons

$$(\mu(S) - D) X = 0 \quad (4)$$

ainsi nous avons deux populations X^* possibles à l'équilibre, la solution

$$X_1^* = 0$$

et la solution correspondante à $\mu(S) = D$, qui s'obtiennent en substituant cette égalité dans l'équation \dot{S} du M1, (1), égal à zéro: $D(S_{in} - S) - kDX = 0$, ainsi nous avons la valeur

$$X_2^* = \frac{S_{in} - S}{k}$$

qui existe uniquement si le taux de consommation de nutriment $k \neq 0$.

Nous procédons de la même manière pour obtenir les valeurs à l'équilibre de nutriment S^* . En supposant l'eq. \dot{S} en eq.(1) égal à zéro, nous avons

$$D(S_{in} - S) - k\mu(S)X = 0 \quad (5)$$

et en substituant la valeur $X_1^* = 0$ en eq. (5) à l'équilibre, en eq. (5) nous avons la valeur à l'équilibre S_1^* correspondante:

$$S_1^* = S_{in},$$

de la même façon nous substituons $X_2^* = \frac{S_{in}-S}{k}$ et l'égalité $\mu(S) = D$ en eq. (5) et nous obtiendrons la valeur S_2^* à l'équilibre:

$$S_2^* = \frac{Dk_s}{\mu_{mx} - D},$$

qui existe seulement si $\mu_{mx} > D$. Cette condition équivaut à celle-ci.

$$\mu_{mx} > \mu(S_{in}) > \mu(S) = D$$

car $X_2^* > 0$ et la fonction (3) est monotone non décroissante. On peut interpréter étant l'inégalité antérieure, précisément $\mu(S_{in}) > D$, comme la vitesse instantanée de croissance des bactéries $\mu(S_{in})$ avec des nutriments qui viennent du réservoir S_{in} et comme étant toujours supérieure au taux de dilution D correspondant, à l'équilibre E_2 .

Nous pouvons résumer les résultats antérieurs dans le tableau suivant:

	E_1	E_2	
X^*	$X_1^* = 0$	$X_2^* = \frac{S_{in}-S_2^*}{k}$	
S^*	$S_1^* = S_{in}$	$S_2^* = \frac{Dk_s}{\mu_{mx}-D}$	
<i>Exis.</i>		$\mu(S_{in}) > D$	(6)

De cette façon nous avons un système d'équations différentielles M1 eq.(1) qui a deux points d'équilibre E_1, E_2 sous les conditions d'existence mentionnées au dessus dans le tableau (6).

Maintenant nous sommes prêts à analyser le comportement des variables (X, S) près des points d'équilibre correspondants E_1, E_2 , c'est à dire leur stabilité ou instabilité locale.

1.2.2 Stabilité ou Instabilité locale

Soit les fonctions du modèle M1 exprimées de la façon suivante

$$F(X, S) = \frac{dX}{dt} = \dot{X} = \mu(S)X - DX$$

et

$$G(X, S) = \frac{dS}{dt} = \dot{S} = D(S_{in} - S) - k\mu(S)X,$$

nous voulons regarder le comportement de ces fonctions près des valeurs à l'équilibre $F(X^*, S^*) = 0$ et $G(X^*, S^*) = 0$. Afin de le faire, nous introduisons de légères perturbations: $F(X^* + x, S^* + s)$ et $G(X^* + x, S^* + s)$, et nous appliquons la série de Taylor correspondante. Ainsi, après quelques simplifications, nous arrivons à

$$F(X^* + x, S^* + s) \simeq \left. \frac{\partial F}{\partial X} \right|_{X^*, S^*} x + \left. \frac{\partial F}{\partial S} \right|_{X^*, S^*} s$$

et

$$G(X^* + x, S^* + s) \simeq \left. \frac{\partial G}{\partial X} \right|_{X^*, S^*} x + \left. \frac{\partial G}{\partial S} \right|_{X^*, S^*} s,$$

que nous pouvons identifier le système vectoriel suivant:

$$\frac{d\chi}{dt} = A^* \chi \tag{7}$$

où χ est le vecteur (x, s) et A^* est la matrice jacobienne correspondante, qui est évaluée en (X^*, S^*) .

D'après les résultats d'algèbre linéaire connus, nous savons que le système au dessus a pour solution:

$$\chi(t) = c_1 v_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 v_2 e^{\lambda_2 t}, \tag{8}$$

où v_i et λ_i sont les valeurs propres et les vecteurs propres correspondants. Nous savons aussi que pour un système 2×2 nous avons les valeurs propres suivantes:

$$\lambda_i = \frac{\beta \pm \sqrt{\delta}}{2}$$

où $\beta = \text{tr}(A)$, $\gamma = \det A$, et $\delta = \beta^2 - 4\gamma$.

Après ces petits rappels, on procédera à l'analyse de la stabilité locale de notre système. D'abord nous obtenons la matrice jacobienne correspondante et nous faisons la substitution dans l'équation (7), nous obtenons le système suivante:

$$\frac{d\chi}{dt} = \begin{pmatrix} \mu(S) - D & X\mu'(S) \\ -k\mu(S) & -(kX\mu'(S) + D) \end{pmatrix} \bigg|_{(X^*, S^*)} \chi, \quad (9)$$

où $\frac{d\mu(S)}{ds} = \mu'(S)$.

Afin de regarder la stabilité du système, nous utiliserons la condition de stabilité comme suit:

Condition de stabilité: Un point d'équilibre χ^* est stable si $tr(A) = \beta < 0$ et $\det A = \gamma > 0$.

Pour notre premier cas nous avons le point d'équilibre $E_1 = (0, S_{in})$. En substituant ce point d'équilibre dans l'équation (9), nous obtenons que pour cette matrice, la trace et le déterminant suivants:

$$\beta = \mu(S_{in}) - 2D \text{ et } \gamma = -D\mu(S_{in}) + D^2, \quad (10)$$

ainsi la condition de stabilité ci-dessus, nous indique que pour que E_1 soit stable nous devons avoir la condition suivante

$$D > \mu(S_{in}), \quad (11)$$

laquelle est tout à fait raisonnable, afin que la population de bactéries vers équilibre $X^* = 0$ et $S = S_{in}$ soit stable, le taux de dilution doit être supérieur à la vitesse de consommation des nutriments qui viennent d'entrer dans la chambre de culture.

Dans le deuxième cas, nous substituons de la même façon le point d'équilibre $E_2 = (\frac{S_{in} - S_2^*}{k}, \frac{Dk_s}{\mu_{mx} - D})$ dans l'équation (9) et nous nous servons de l'égalité à équilibre $D = \mu(S)$ afin d'obtenir la trace et le déterminant à l'équilibre:

$$\beta = -[(S_{in} - S_2^*)\mu'(S_2^*) + \mu(S_2^*)] \text{ et } \gamma = (S_{in} - S_2^*)\mu'(S_2^*)\mu(S_2^*), \quad (12)$$

nous savons que la fonction (3), $\mu(S)$, est monotone non décroissante, alors

$$\mu(S) > 0 \text{ et } \mu'(S) > 0 \forall S,$$

ainsi il suffit pour que le point soit stable que nous ayons la condition suivante $S_{in} > S_2^*$.

Ceci, est toujours le cas de stabilité, car les deux points sont sur la droite $x = \frac{S_{in}-s}{k}$, où $S_{in} > S \forall S > 0$, si et seulement si on est dans le cas d'existence d' équilibre 2 c'est à dire

$$\mu(S_{in}) > D \quad (13)$$

Nous verrons cette propriété plus en détail dans la section suivante. Ainsi on peut conclure que l'équilibre E_2 est toujours localement stable.

1.2.3 Plans de phase

D'après les informations obtenues dans les sections précédentes, nous sommes prêts à tracer notre plan de phase correspondant. Nous utiliserons l'information obtenue dans le tableau (6) et les informations correspondantes sur leur instabilité dans les équations (11) et (13).

D'abord on tracera les isoclines nulles, c'est à dire les points où $F(X,S)$ et $G(X,S)$ leur dérivée respective est égale à 0. Ainsi pour la première fonction $F(X,S)$, nous savons pour l'équation (4) qu'on a deux isoclines nulles

$$I_{n1} : X = 0 \quad (14)$$

et la droite correspondante à $\mu(S) = D$, qui précisément est la droite définie par S_2^*

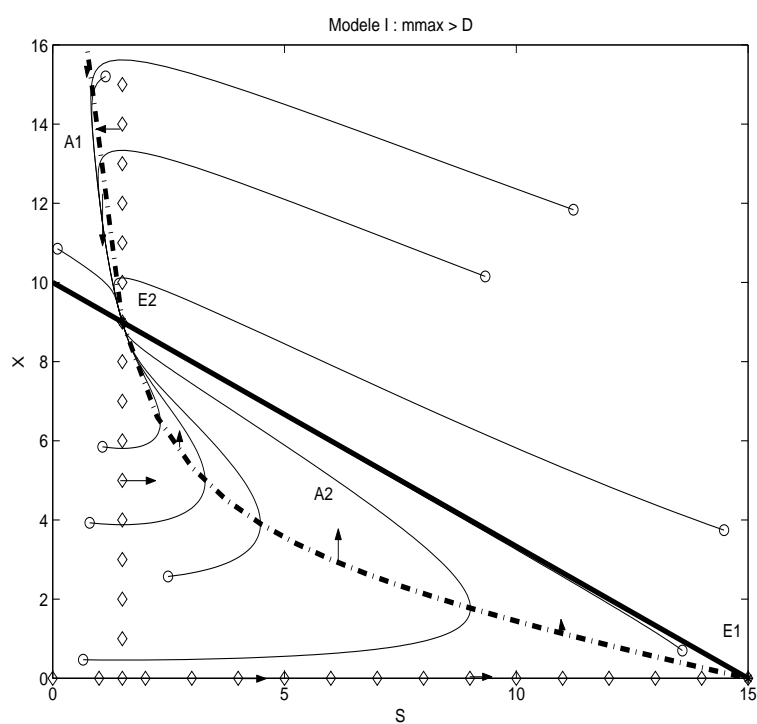
$$I_{n2} : S_2^* = \frac{Dk_s}{\mu_{mx} - D}. \quad (15)$$

De la même façon nous procédons pour la deuxième fonction $G(X,S)$, ainsi en substituant l'équation (5) et en mettant cette équation en fonction de X nous avons

$$I_{n3} : X = \frac{D(S_{in} - S)}{\mu(S)k}. \quad (16)$$

Afin de bien regarder notre plan de phase on ajoutera les solutions correspondantes aux équations différentielles du modèle M1 eq. (1) obtenus par Matlab en prenant différentes conditions initiales marques par o. On marquera les isoclines nulles par triangles en vert: I_{n1} et I_{n2} et la troisième isocline I_{n3} par la ligne discontinue - . - . Aussi, nous avons ajouté à ce graphique la droite $X = \frac{(S_{in}-S)}{k}$, que nous verrons dans la section postérieure.

Dans ce plan de phase nous avons utilisé la condition de stabilité (13) pour le deuxième équilibre, c'est à dire $\mu(S_{in}) > D$. Il est évident dans le plan de phase antérieur que pour n'importe quel point où $S_{in} > S$ la trajectoire correspondant se dirigera vers l'équilibre attirant E_2 indiqué dans le tableau (6). On peut constater que les régions A1 et A2 des domaines positivement invariants où n'importe quel point sera dirigé vers l'équilibre E_2 . De plus, la droite définie par $kx + S = S_{in}$ nous divise le plan en deux régions où les trajectoires

FIG. 2 – *Modèle 1: $\mu(S_{in}) > D$.*

ne pourront pas traverser.

Maintenant on verra ce qui passe avec les mêmes données que le graphique antérieur, mais en changeant la condition de stabilité, cette fois ci: eq. (11) i.e. $\mu(S_{in}) < D$.

Cette fois ci pour n'importe quel point où $S_{in} > S$ la trajectoire correspondante se dirigera vers l'équilibre E_1 indiqué dans le tableau (6) et encore une fois les trajectoires ne pourront pas traverser la droite $kx + S = S_{in}$.

On peut conclure d'après les deux graphiques antérieurs que le comportement du système et la stabilité des points d'équilibre dépend de la relation entre $\mu(S_{in})$ et D .

1.3 Modèle réduit avec changement de variable, MR

Afin d'analyser les propriétés du système antérieur nous ferons le changement de variable suivant:

$$z = kX + S,$$

avec les mêmes hypothèses et définitions faites auparavant. En utilisant la règle de la chaîne pour dériver nous avons l'équation différentielle suivante:

$$\frac{dz}{dt} = \dot{Z} = D(S_{in} - Z) \quad (17)$$

Finalement nous avons le système à analyser

$$\frac{dz}{dt} = \dot{Z} = D(S_{in} - Z) \quad (18)$$

$$\frac{ds}{dt} = \dot{S} = D(S_{in} - S) - \mu_{mx} \frac{S}{S + k_s}(z - S). \quad (19)$$

avec les mêmes entrées, sorties, paramètres et la condition initiale du modèle M1, eq. (1) Afin d'analyser le système donné par les équations: (18) et (19) nous procéderons comme la section antérieur, on regardera les points d'équilibre, la stabilité et le plan de phase correspondant.

1.3.1 Points d'équilibre

En faisant la dérivée correspondante égale à 0 dans l'eq (17) on a

$$\dot{Z} = D(S_{in} - Z) = 0, \quad (20)$$

d'où on déduit le point d'équilibre $E_1 : Z = S_{in}$.

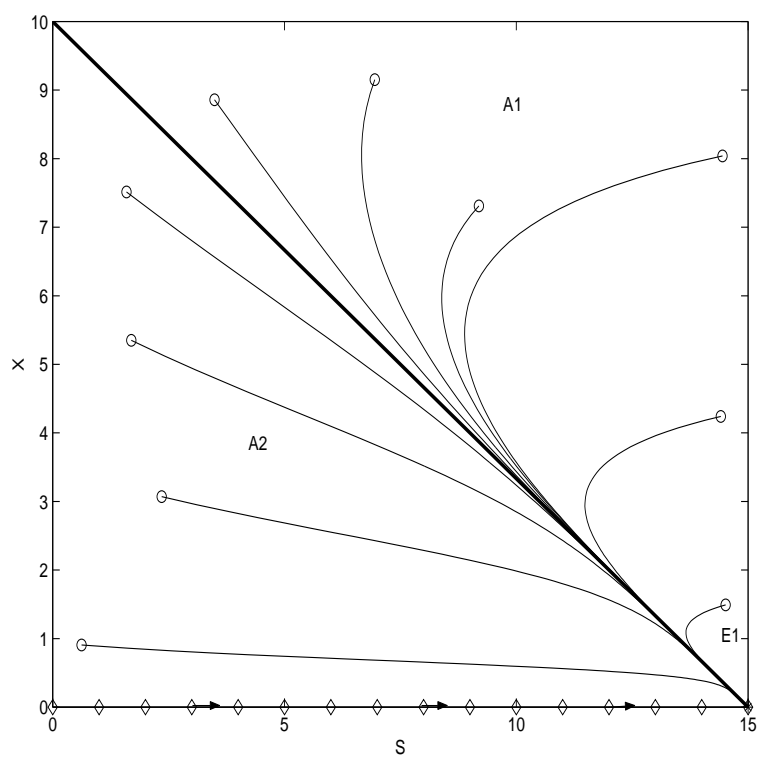


FIG. 3 – *Modèle 1: $\mu(S_{in}) \leq D$.*

Afin de voir la stabilité de point E_1 on étudiera leur Jacobienne comme dans le cas antérieur. Ainsi on fait les calculs correspondants et nous substituons dans l'équation (9), en obtenant le système suivant:

$$\frac{d\chi}{dt} = \begin{pmatrix} D & 0 \\ -mu(S) & mu'(S) * (1 - S_{in}) - D \end{pmatrix} \chi, \quad (21)$$

qui est tout à fait stable, car $tr(A) = \beta < 0$ et $\det A = \gamma > 0$ (de la même manière qu'on a vu dans la section antérieure. En plus, car ce système est stable, on ajoutera ici l'analyse de la stabilité globale du système (17). Ainsi si $D \neq 0$ si nous faisons $Z \rightarrow S_{in}$ i.e. $kx + s \simeq S_{in}$ où $s < S_{in}$, alors le système (17) se réduit, et on analyse que:

$$\dot{S} = (S_{in} - S)[D - \mu(S).] \quad (22)$$

Le système (22) est globalement stable car pour toute condition initiale où la coordonnée S est soit $s < S_{in}$, la trajectoire définie par ce point ira vers le équilibre S^* . Cette affirmation est confirmée par le plan de phase correspondant à l'équation (22) qu'on verra dans la subsection suivante.

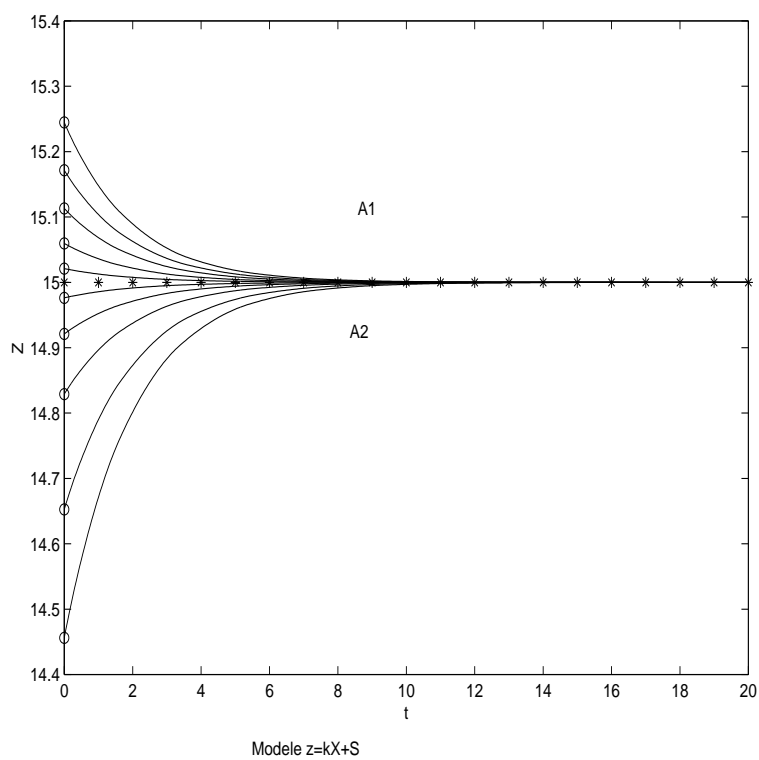
1.3.2 Plan de phase

On pourrait constater dans le plan de phase qu'au cours du temps, toutes les combinaisons linéaire vont sur la constante $Z = S_{in}$, autrement dit que la droite $z = S_{in}$ attire tous les solutions du système étudié.

Nous ajouterons les solutions correspondantes à l'équation différentielle (20) obtenues par Matlab en prenant des conditions initiales différentes conditions initiales marquées par o. Nous avons ajouté à ce graphique la droite $z = S_{in}$, c'est à dire la même droite que celle utilisée dans les graphes de la section antérieure $kX + S = S_{in}$.

Comme vu dans les deux plans de phases antérieures pour le modèle 1, la droite $z = S_{in}$ est une droite de points à l'équilibre stable et attirant. Les trajectoires prises quand les conditions initiales dans le graphique antérieur sont différentes, nous confirment cette affirmation.

Grâce à ce changement de variable on peut dire que le modèle 1 est attiré par la droite de points à l'équilibre $z = S_{in}$, et que toute point à l'équilibre sera contenu dans cette droite, et, de plus, on ne peut pas traverser cette droite. Aussi nous avons conclu que le système pour $s < S_{in}$ est globalement stable.

FIG. 4 – *Modèle $Z = kX + S$*

1.4 Variation du modèle M1H

Dans cette section nous étudierons le même système dynamique, représenté par ces équations différentielles (1), mais on changera la fonction de croissance $\mu(S)$, en permettant cette fois ci la possibilité d'une inhibition dans la croissance des bactéries, causé par un excès de nutriment. Nous prendrons le taux de croissance de type Haldane [Andrews 1968]:

$$\mu(S) = \mu_{mx} \frac{S}{S + k_s + \frac{S^2}{k_i}} \quad (23)$$

où: μ_{mx} = Le taux de croissance maximal,
 k_s = Constante de saturation,
 k_i = Constante d'inhibition,

avec les mêmes entrées, sorties, paramètres et conditions initiales.

Dans le graphique suivant on peut observer le taux de croissance en fonction de la quantité de nutriment. Cette fonction arrive a un maximum, mais au fur et à mesure que la quantité de nutriment grandit, $\mu(S)$ commence à diminuer, c'est à dire $\lim_{s \rightarrow \infty} \mu(S) = 0$.

1.4.1 Points d'équilibre

De la même façon que nous avons procédé dans la première section, on prend les équations différentielles égales à 0, c'est à dire nous prenons les équations (4) et (5), et nous faisons les simplifications nécessaires afin d'obtenir les points d'équilibre. Dans le premier cas vu que la fonction $\mu(S)$ n'intervient pas on a le même équilibre $E_1 = (X_1^*, S_1^*) = (0, S_{in})$. Par contre, pour les autres équilibres nous n'avons que la deuxième solution à l'équation (4):

$$\mu(S) = D, \quad (24)$$

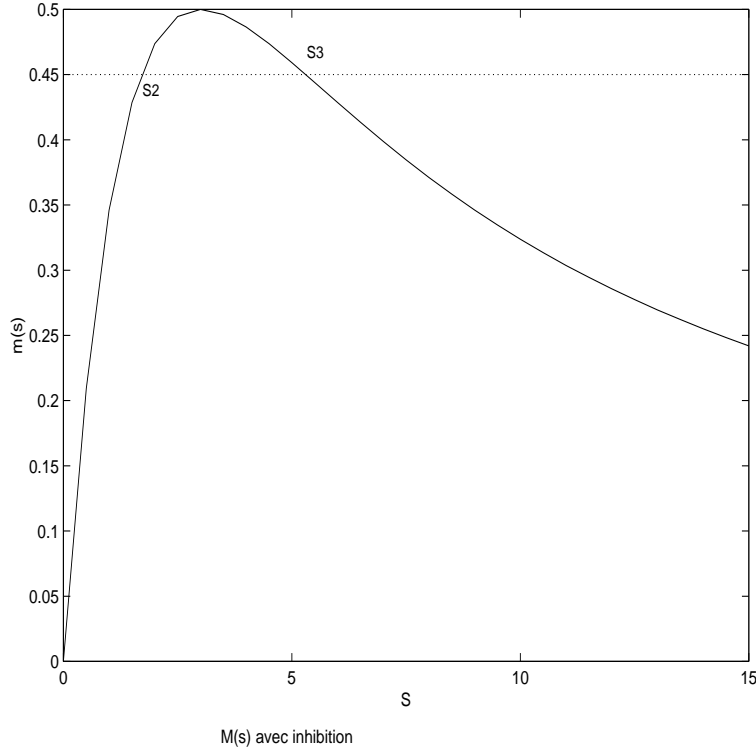
qui correspond à deux différentes solutions aux points d'équilibre S_2^* et S_3^* (voir la graphe). En remplaçant la vitesse de croissance $\mu(S)$ donnée au dessus dans l'équation (23) on arrive à l'équation suivante en deuxième degré

$$S^2 + S(k_i - \mu_{mx}k_i/D) + k_ik_s = 0,$$

qui a pour solutions

$$S_{2,3}^* = \frac{-(k_i - \mu_{mx}k_i/D) \pm \sqrt{(k_i - \mu_{mx}k_i/D)^2 - 4k_ik_s}}{2}, \quad (25)$$

on peut constater que les solutions antérieures peuvent être complexes ou réelles, cela dépendra des constantes k_i , k_s et μ_{mx} établies dans le modèle.

FIG. 5 – *Fonction croissance d'Haldane*

Pour obtenir les points d'équilibre correspondants X_2^* et X_3^* nous substituons $\mu(S) = D$ et S_2^* et S_3^* dans la deuxième eq. (5), ainsi nous avons les valeurs correspondantes:

$$X_2^* = \frac{S_{in} - S_2^*}{k} \text{ et } X_3^* = \frac{S_{in} - S_3^*}{k},$$

qui existent seulement si le taux de consommation de nutriment $k \neq 0, S_2 < S_{in}$ et $S_3 < S_{in}$. Ainsi nous avons trois équilibres qui nous montrent dans le tableau suivant:

$$\begin{array}{ccc} \begin{array}{c} E_1 \\ X^* \\ S^* \end{array} & \begin{array}{c} X_1^* = 0 \\ S_1^* = S_{in} \end{array} & \begin{array}{c} E_2 \\ X_2^* = \frac{S_{in} - S_2^*}{k} \\ S_2^* \end{array} & \begin{array}{c} E_3 \\ X_3^* = \frac{S_{in} - S_3^*}{k} \\ S_3^* \end{array} \end{array} \quad (26)$$

De cette façon nous avons un système d'équations différentielles du modèle M1, qui a deux

points d'équilibre E_1, E_2 sous la condition d'existence $k \neq 0$.

Maintenant nous sommes prêts à analyser le comportement des variables (X, S) près des points d'équilibre correspondants E_1, E_2 , c'est à dire leur stabilité ou instabilité locale.

1.4.2 Stabilité ou Instabilité locale

De la même manière qu'on a procédé dans la première section pour étudier les perturbations près de l'équilibre, on étudiera le système d'équations correspondant (9)

$$\frac{d\chi}{dt} = \begin{pmatrix} \mu(S) - D & X\mu'(S) \\ -k\mu(S) & -(kX\mu'(S) + D) \end{pmatrix} \bigg|_{(X^*, S^*)} \chi \quad (27)$$

où $\mu(S)$ (23) et $\mu'(S)$ sont leur dérivée respective.

Sachant que notre premier équilibre $E_1 = (0, S_{in})$ ne dépend pas du taux de croissance $\mu(S)$, on a vu dans la section antérieure que le point est stable si le système dynamique suit la condition $D > \mu(S_{in})$.

Dans le deuxième cas, nous substituons le point d'équilibre $E_2 = (\frac{S_{in}-S_2^*}{k}, S_2^*)$ dans l'équation (27) et nous nous servons de l'égalité à équilibre $D = \mu(S)$ afin d'obtenir la trace et le déterminant:

$$\beta = -[(S_{in} - S_2^*)\mu'(S_2^*) + \mu(S_2^*)] \text{ et } \gamma = (S_{in} - S_2^*)\mu'(S_2^*)\mu(S_2^*), \quad (28)$$

nous savons que $S_{in} > S_2^*$ car $D = \mu(S)$ et aussi que le taux de croissance $\mu(S)$, de l'équation (23) ne prend que des valeurs positives $\mu(S) > 0 \forall S$, mais comme on peut constater dans le graphe (23), la dérivé $\mu'(S)$ peut être positive ou négative. Sans perdre la généralité nous supposons $S_2^* < S_3^*$. Et de plus nous savons que si on trace la droite $D = \mu(S)$ sur le graphique (23) alors que $\mu'(S_2^*) > 0$ et $\mu'(S_3^*) < 0$.

Avec les inégalités exprimées au dessus on sait que pour le point d'équilibre E_2

$$\beta < 0 \text{ et } \gamma > 0$$

et en appliquant la condition de stabilité de la première section on sait que le point E_2 est stable. Nous pouvons constater aussi, que si on se pose sur la droite $S_{in} = S_2^* + kX_2^*$, le système (22) avec la nouvelle $\mu(S)$ n'est pas globalement stable car il existe des conditions initiales où $S < S_{in}$, mais la trajectoire définie va tomber sur E_1 . De cette façon le point E_2 est localement stable mais globalement instable.

Pour le troisième point d'équilibre $E_3 = (\frac{S_{in}-S_3^*}{k}, S_3^*)$, on peut suivre la même équation (28) pour la trace et le déterminant, mais $\mu'(S_3^*) < 0$, d'après notre supposition. Alors

$$\beta > 0 \text{ et } \gamma < 0,$$

ce qui est instable et qui de plus comme on verra dans le plan de phase est un point selle.

Maintenant nous allons voir si les points d'équilibre stables: E_1 et E_2 sont globalement stables.

Pour le premier équilibre E_1 on a vu dans la première section qu'il est globalement stable si $\mu(S_{in}) < D$, car un taux de dilution majeur amène à ce résultat à l'équilibre sans prendre en compte la vitesse de croissance $\mu(S)$.

Ici nous ferons l'analyse pour le point E_2 . Pour ce faire il suffit de regarder l'équation réduite avec un changement de variable et en prenant $kx + s \simeq S_{in}$ c'est à dire l'équation: (22) avec la fonction de croissance $\mu(S)$. Car $\mu(S)$ n'est pas une fonction monotone croissante ou décroissante, par contre elle atteint un maximum, sa dérivée peut être croissante ou décroissante. Ainsi il existe des points de conditions initiales (X, S) $S < S_{in}$, où les trajectoires vont vers E_2 . Ainsi le point d'équilibre E_1 n'est stable que localement. Cette affirmation est attendue car la fonction d'inhibition ajoute plus d'instabilité au système quand l'inhibition et la population des bactéries X tendent à disparaître à l'équilibre E_2 . Ces résultats sont évidents dans le plan de phase de la section suivante.

1.4.3 Plan de phase

A la manière du premier modèle, avec les informations obtenues au dessus dans les équations (26) et les informations correspondantes sur leur stabilité ou non, nous sommes prêt à tracer notre plan de phase.

D'abord on tracera les isoclines nulles, pour la première fonction $F(X, S)$, nous savons pour l'équation (4) qu'on a trois isoclines nulles

$$I_{n1} : X = 0 \quad (29)$$

et les droites correspondantes à $\mu(S) = D$, qui sont les droites définies par S_2^* et S_3^* , ainsi en substituant ces valeurs en 25, on a les isoclines nulles

$$I_{n2} : S_2^* = \frac{-(k_i - \mu_{mx} k_i) + \sqrt{(k_i - \mu_{mx} k_i)^2 - 4k_i k_s}}{2} \quad (30)$$

et

$$I_{n3} : S_3^* = \frac{-(k_i - \mu_{mx} k_i) - \sqrt{(k_i - \mu_{mx} k_i)^2 - 4k_i k_s}}{2} \quad (31)$$

Nous procédons de la même façon pour la deuxième fonction $G(X, S)$, en substituant l'équation (5) et en mettant cette équation en fonction de x nous avons,

$$I_{n3} : X = \frac{D(S_{in} - S)}{\mu(S)k} \quad (32)$$

où $\mu(S)$ et le taux de croissance correspondant au modèle avec inhibition.

Pour mieux étudier notre plan de phase on ajoutera les solutions correspondants aux équations différentielles du système M1 obtenues par Matlab en prenant différentes conditions initiales marquées par \circ . On marquera les isoclines nulles en vert: I_{n1}, I_{n2} et I_{n3} par triangles et I_{n4} par - . - . Nous avons ajouté à ce graphique la droite $X = \frac{(S_{in}-S)}{k}$, ce qui permet de constater que les différentes trajectoires vont sur cette droite, et ne la traversent pas.

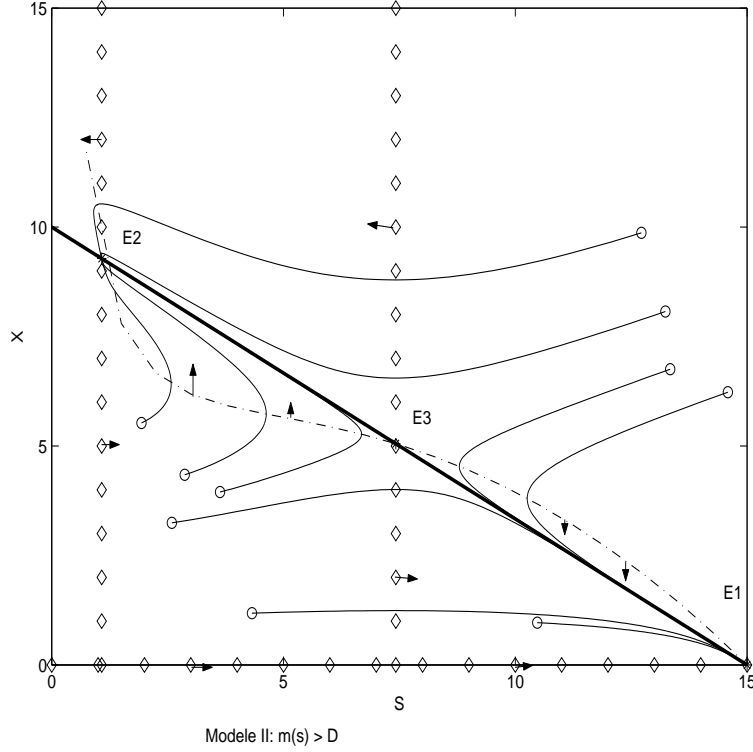


FIG. 6 – Plan de phase du modèle M1H cas: $\mu(S) = D$

Il est évident dans le plan de phase antérieur qu'aucune trajectoire ne se dirige vers l'équilibre E_3 qui est, en fait, un point siège, ainsi toutes les trajectoires tendent vers E_2 ou E_1 . Nous constatons aussi que la droite définie par $kx + S = S_{in}$ divise le plan en deux régions A1 et A2 où les trajectoires ne pourront pas traverser. On peut voir aussi que les deux points: E_2 ou E_1 sont stables localement, mais pas globalement, comme décrit la section antérieure. Maintenant on verra ce qui passe avec les mêmes données que le graphique antérieur, mais en changeant la condition de stabilité, cette fois ci (11) $\mu(S_{in}) < D$.

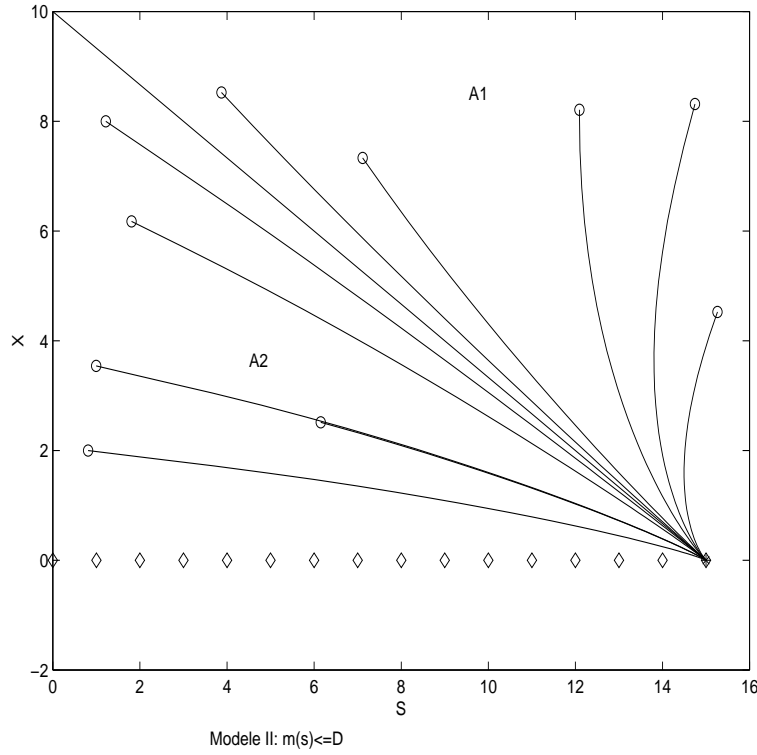


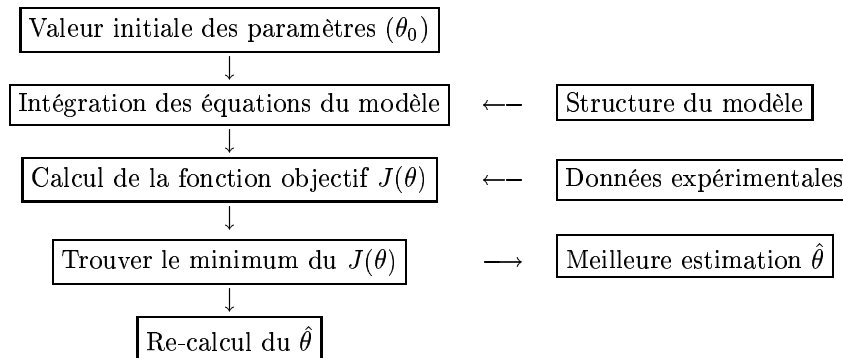
FIG. 7 – *Plan de phase du modèle M1H cas: $D > \mu(S_{in})$*

Cette fois ci pour n'importe quel point ou $S_{in} > S$ la trajectoire correspondante se dirigera vers l'équilibre E_1 indiqué dans le tableau (6).

Il faut signaler que l'analyse antérieure est valide même si les solutions à l'équilibre sont complexes. La complexité des solutions dépend directement des constantes d'inhibition k_i , saturation k_s du taux de dilution D et de la vitesse maximale $\mu_{m.x}$. On peut conclure d'après les deux graphiques antérieurs que le comportement du système est globalement instable, mais on sait que le première et deuxième point à l'équilibre sont localement stables en même temps.

2 Estimation des paramètres

Nous présentons la démarche générale à suivre afin d'estimer des paramètres d'un modèle [Walter 1997] :



Chacune des étapes est très important et nous pouvons utiliser plusieurs outils afin de mieux l'accomplir.

D'abord nous devons donner une valeur de départ à nos paramètres, soit par une estimation du vecteur θ_0 ou bien grâce aux informations que l'on possède a priori.

Puis, nous devons analyser la structure du modèle pour bien choisir notre méthode d'intégration des équations du modèle. Après, à partir de l'information expérimentale ou des données que nous avons, nous pouvons construire notre fonction $J(\theta)$ à partir d'une méthode d'estimation telle que: Maximum Vraisemblance Estimation, Estimation Bayésien, Non Paramétrique Estimation etc.

Il nous reste à trouver la meilleure estimation de θ en choisissant entre les méthodes de minimisation de la fonction $J(\theta)$ existantes: Steepest Descend Gradient, Newton's Optimisation, LMR etc.

Finalement, nous recommençons le boucle jusqu'à la meilleure estimation du vecteur de paramètres θ .

Dans chaque étape nous devons être assez méfiant vis à vis des résultats obtenus, sachant que nous avons choisi une méthode et qu'il en existe plusieurs. Ainsi il sera souhaitable de tester plusieurs méthodes à chaque étape afin de réduire la possibilité d'échec dans chaque partie.

2.1 Données expérimentales

Nous avons utilisé deux jeux de données expérimentales dans nos différents modèles, les données AMOCO pour le premier et les données AGRALCO pour le deuxième.

1. Caractéristiques des données AMOCO [Bernard 2001]:

Ils ont été obtenues dans le cadre du projet européen AMOCO. Le substrat, S a été obtenu à partir des vinasses produites dans des distilleries diverses de la région de Narbonne, France. Le bioréacteur utilisé est à gradient spatial de concentration, couramment dit, à lit fixe (l'endroit de culture n'est pas homogène) et de fonctionnement du type continu où chémostat, avec une capacité de 948 litres.

Les mesures ont été obtenues au fur et au mesure pendant trois mois (83 jours) à intervalles de 15 minutes entre chaque mesure.

2. Caractéristiques des données AGRALCO [Telemac 2003]:

Ces données font partie du jeux de données utilisées dans le projet européen TELEMAC. Le substrat, S a été obtenu à partir des vinasses produites dans des distilleries de la région de Galicia, Espagne. Le bioréacteur utilisé est CSTR (l'endroit de culture est homogène) et le fonctionnement du type chémostat, avec une capacité de 2,000,000 litres.

Les mesures ont été obtenues à l'aube pendant neuf mois (263 jours) à intervalles d'une journée entre chaque mesure.

Commentaires sur ces jeux des données et leur utilisation pour l'estimation des paramètres de nos modèles :

AMOCO : Nous avons utilisé ce jeu des données car il est très robuste, sachant qu'on a un total de 7521 mesures autour de 83 jours, ce qui représente assez de mesures pour trouver des conditions asymptotiques de nos modèles. Pourtant, les données ont été coupées pendant les dix derniers jours (manque de fiabilité expérimentale pour ces jours là et elles sont chaotiques).

AGRALCO : Nous avons utilisé ce jeu des données, mais les résultats issus de ces données ne sont pas présentés. La raison principale est qu'elles sont très bruitées et elles ne possèdent pas la précision nécessaire pour l'estimation des paramètres.

2.2 Modèle M1

Nous prenons notre modèle M1 eq.(1) avec ses entrées et sorties correspondantes, mais le vecteur des paramètres, θ devient:

$$\theta = (k, \mu_{mx}, k_s, X_0),$$

car nous ne connaissons rien de X à partir des données expérimentales. D'après avoir faire le test d'identifiabilité à partir du programme 'Identifiability test' nous nous apercevons

que \longrightarrow le modèle M1 n'est pas structurellement globalement identifiable avec ce vecteur des paramètres. Ceci dit, nous pourrions estimer des combinaisons des paramètres qui nous donneront quelques informations sur le système étudié, mais nous choisirons la voie des modèles simplifiés afin de mieux comprendre le bioprocédés et obtenir des conclusions sûres et certaines sur ceux ci..

2.3 Modèle simplifié MS1

Sachant que le modèle M1 n'est pas globalement identifiable, nous avons construit un modèle simplifié de celui ci. Ce modèle simplifié, MS1, nous permettra de mieux connaître ce bioprocédé à cause de sa relative simplicité. Afin de le construire nous avons pris les hypothèses suivantes:

- X varie très peu,

$$X_{min} \leq X \leq X_{max}$$

et on a choisi: $X \simeq \hat{X}$, sa valeur moyenne.

- Nous prenons le paramètre: $\lambda = k\mu_{mx}\hat{X}$
- k_s fixe, dans l'intervalle $[1, \infty)$

De cette manière le système M1 devient

$$\dot{S} = D(S_{in} - S) - \lambda \frac{S}{S + k_s}, \quad (MS1)$$

avec les entrées u , la sortie y , la condition initiale ξ_0 et θ le vecteur des paramètres:

$$u = \begin{pmatrix} D \\ S_{in} \end{pmatrix}, y = (S), \theta = (\lambda), \xi_0 = (S_0).$$

Nous verrons si le système ci dessus, MS1, est structurellement identifiable pour λ . Nous utiliserons la méthode de la dérivée successive de la sortie afin d'accomplir notre but. Ainsi, nous prenons la sortie:

$$y = h(\xi, t, u, \theta) = S,$$

et nous faisons les dérivées successives jusqu'à démontrer que le jeux de paramètres $\theta = \lambda$ a une solution unique. Nous ferons notre analyse dans un point $t=0$. Nous évaluerons la première dérivée de la sortie en ce point, c'est à dire:

$$y'(0) = S'(0) = D(0)(S_{in}(0) - S(0)) - \lambda \frac{S(0)}{S(0) + k_s},$$

Sachant que tous les informations de l'équation antérieur sont connus, nous pouvons dégager le paramètre λ , en obtenant ainsi une solution unique, ainsi le modèle est globalement

identifiable s.g.i.

Sachant que notre modèle MS1 est s.g.i., nous procéderons à l'estimation respective du paramètre λ .

D'abord nous utiliserons l'astuce de la moyenne temporelle de la variable en question, S , qui équivaut à intégrer l'équation différentielle, MS1, dans l'intervalle $[t-T, t]$ et en prenant la moyenne, où T est la période choisie. Ainsi nous avons:

$$\frac{1}{T} \int_{t-T}^t \dot{S} d\tau = \frac{1}{T} \int_{t-T}^t \left(D(S_{in} - S) - \lambda \frac{S}{S + k_S} \right) d\tau,$$

que nous pouvons réduire à l'expression suivante:

$$\frac{S(t) - S(t-T)}{T} - \frac{1}{T} \int_{t-T}^t D(\tau)(S_{in}(\tau) - S(\tau)) d\tau = -\lambda \int_{t-T}^t \frac{S(\tau)}{S(\tau) + k_S} d\tau. \quad (33)$$

Ainsi, nous avons converti l'équation différentielle MS1 en l'équation antérieure où nous connaissons toute l'information à chaque instant, t_i , d'après les données expérimentales. D'autre part en renommant le côté gauche de l'équation en $A(t)$ et le côté droit de celle-ci en $-\lambda C(t, k_S)$, nous pouvons la ré-écrire comme suit:

$$A(t) = -\lambda C(t, k_S), \quad (34)$$

cette équation est linéaire dans le paramètre λ et nous la connaissons dans chaque instant t à partir des données expérimentales. Maintenant, nous sommes prêts à construire notre fonction objective $J(\theta)$, il suffit d'égaliser l'eq.(34) à 0 et prendre la somme à chaque instant t , c'est à dire:

$$J(\lambda, k_S) = \sum_i [A(t_i) + \lambda C(t_i, k_S)]^2, \quad (35)$$

avec $k_S \in [0, \infty)$ fixé à l'avance. Afin de trouver notre paramètre $\hat{\theta}$ optimal il suffit de minimiser la fonction antérieure:

$$\hat{\theta} = \operatorname{argmin} (J(\lambda, k_S)). \quad (36)$$

Il est important de noter que la minimisation de la fonction objective eq.(36) équivaut à faire le couramment utilisé méthode de minimums carrées. En plus, car nous sommes dans le cas linéaire, ceci équivaut aussi à faire une régression linéaire simple de l'eq.(34). Cette équivalence sera très utile pour nos analyses de résultats.

2.3.1 Résultats pour MS1

Afin de tester et analyser notre modèle, MS1, nous avons réalisé un programme en Matlab, d'abord nous avons vérifié la validité du modèle à partir des simulations avec et sans bruit, et une fois prouvé l'identifiabilité pratique du modèle, nous l'avons testé avec des données réelles d'AMOCO, déjà expliquées dans la section précédente. Finalement nous avons fait une analyse des résultats obtenus.

2.3.2 Résultats du programme en simulation pour MS1

Afin de mesurer l'erreur entre les valeurs simulées et les estimées nous avons utilisé cette mesure en pourcentage:

$$Error = \left(\frac{(\sum_i [(\hat{y}_i - y_i)/y_i]^2)}{mes(t)} \right) * 100, \quad (37)$$

où \hat{y}_i est la sortie estimée et y_i la sortie simulée à chaque instant t_i , et la fonction: $mes(t) = taille(t) - T$ est la mesure utilisé du vecteur temporel avec, T , la période correspondante et $taille(t)$ est la taille du vector t . Pour choisir la période T optimal nous avons pris le minimum de l'eq.(37) en fonction de \hat{y} et T , c'est à dire:

$$min_T[Error(\hat{y}, T, t)]$$

et nous avons constaté que la période optimale est $T = 251$ pour les données AMOCO.

Sachant la période optimale, nous sommes prêts à tester notre modèle, d'abord nous avons simulé des données à partir du modèle MS1 en prenant des valeurs initiales issues de la littérature (Art. Dynamical Model Amoco), après nous avons mise en marche notre méthode d'estimation en utilisant l'eq. (36). Puis nous avons effectué deux comparaisons: la première ponctuellement en comparant le paramètre θ avec le paramètre estimé $\hat{\theta}$ et l'autre avec la mesure de l'erreur relative en utilisant l'eq.(37).

Le graphique suivant nous présente la sortie estimée $\hat{y} = \hat{S}(t)$ en noir versus la sortie simulée $y = S(t)$ en bleu interligne:

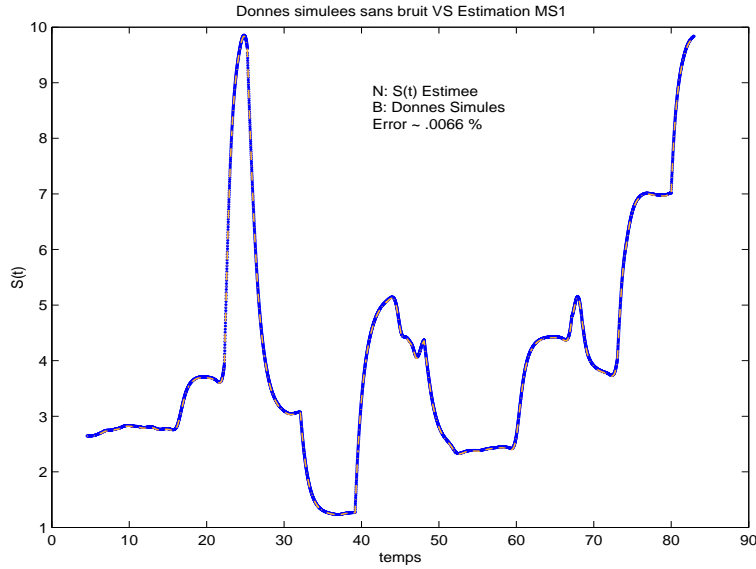


FIG. 8 –

Nous avons trouvé que l'estimation ponctuelle est la même i.e. $\lambda = 8.293 \simeq \hat{\lambda} = 8.295$ et nous pouvons apprécier que la sortie estimée et la sortie simulée se suivent pratiquement parfaitement au cours du temps. L'erreur relative de .0066 per cent est presque nulle. Alors nous pouvons conclure que l'estimation de $\hat{\lambda} = 8.295$ est sans biais. Ce résultat est attendu car nous avons retrouvé le paramètre que nous avons mis dès le début dans la simulation. Alors notre modèle et le programme correspondant fonctionnent correctement. En plus, comme nous avons utilisé la méthode des moindres carrés, nous savons par la théorie des méthodes d'estimation statistiques que cela équivaut à utiliser la méthode de maximum de vraisemblance qui donne des estimateurs sans biais [Mood 1983].

Maintenant nous verrons la sensibilité du modèle si nous bruitons les données simulés. Le premier sort de bruit sera normal de moyenne nulle et espérance unitaire i.e. $N(0,1)$. Dans le graphique suivant nous présentons: $\hat{y} = \hat{S}(t)$ en noir, $y = S(t)$ en bleu interligne et le bruit normal avec des points en jaune:

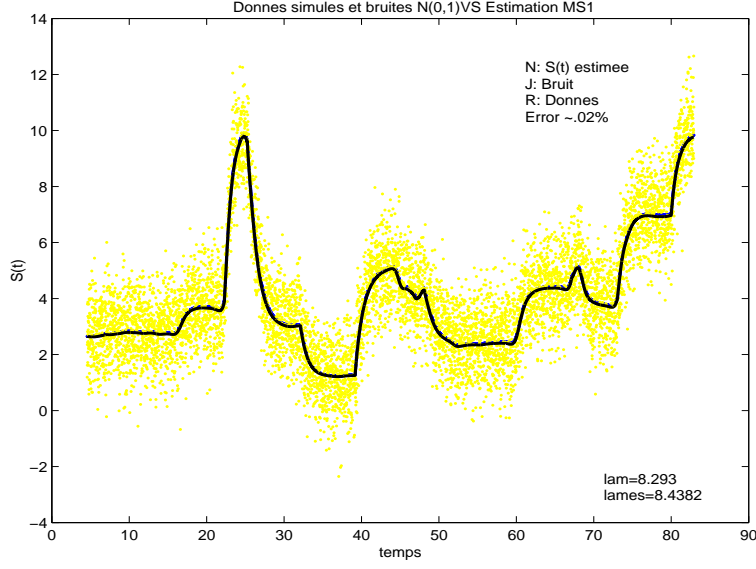


FIG. 9 –

Ci dessus, même si l'estimation ponctuelle est légèrement différent $\lambda = 8.293$ versus $\hat{\lambda} = 8.438$, l'erreur relative de .02 sous cent est continue très bas.

Cette fois ci nous avons fait un essai avec un bruit de distribution uniforme centré i.e. $U(-.5, .5)$. Nous exprimons les fonctions de la même façon que pour le graphique antérieur et nous avons:

Les conclusions sont similaires aux conclusions avec le bruit normal, nous avons l'erreur relative de $\sim .0027 \%$ qui continue bas.

Cette fois ci nous essaierons avec des données plus bruitées. Dans le graphique suivant nous avons un bruit Normal $2xN(0,1)$ double, les fonctions sont exprimées de la même façon que les précédentes:

Bien que l'erreur relative ait augmenté le taux se maintient très bas $\sim .028 \%$.

Nous avons aussi augmenté le bruit uniforme en prenant un bruit $U(-.75, +.75)$ et voici la graphe correspondante avec les mêmes spécifications:

Nous constatons que l'erreur a augmenté jusqu'à $\sim .58 \%$, ce qui est encore acceptable.

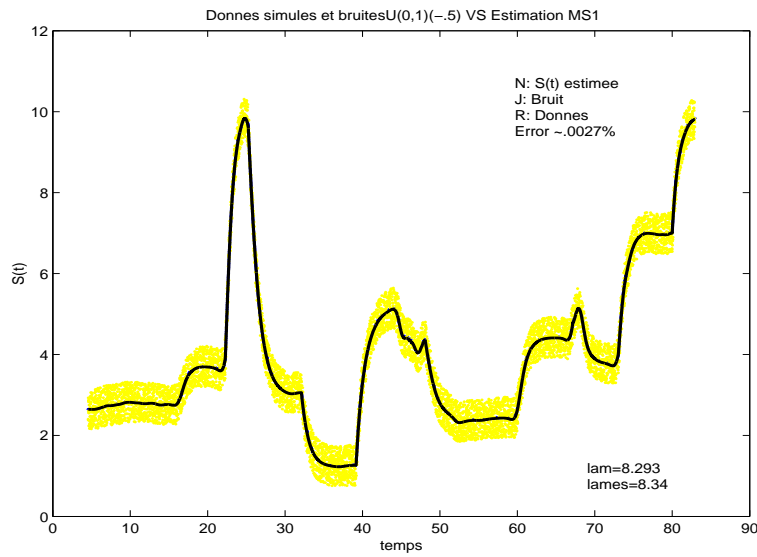


FIG. 10 –

Afin de savoir si le modèle est pratiquement identifiable nous avons mis comme critère une limite de 1 % d'erreur relative. Ainsi si les données utilisées ont un bruit qui fait que le modèle a une erreur relative ≥ 1 %, nous estimerons qu'il n'est pas identifiable en pratique avec ces données.

Nous avons essayé d'autres bruits plus grands que ceux ci présentés ici, mais ils donnent des erreurs relatives plus grandes que notre seuil de ≥ 1 %.

Maintenant nous pouvons conclure que notre méthode d'estimation déjà implémenté avec le modèle *MS1* est correcte et le paramètre estimé, $\hat{\lambda}$, est unique et sans biais si les données ne sont pas bruitées et il sera pratiquement non identifiable si les données sont très bruitées, c'est à dire au delà de notre seuil.

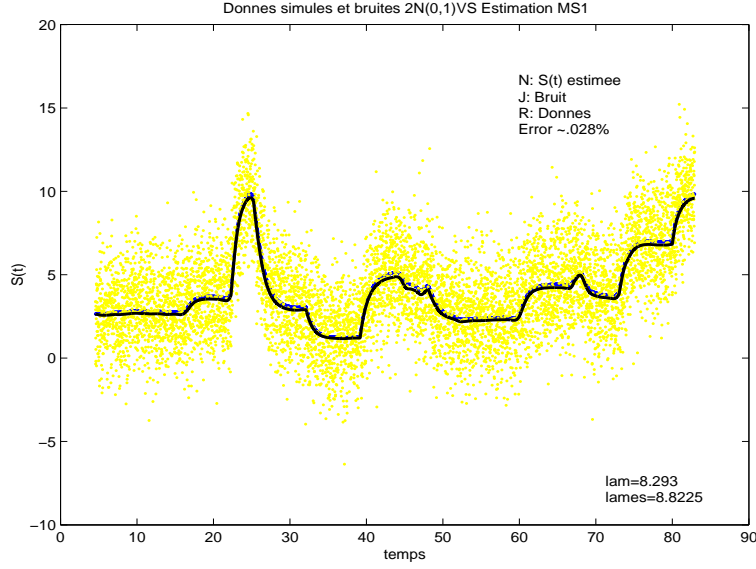


FIG. 11 –

2.3.3 Résultats avec les données réelles d'AMOCO pour MS1

Nous avons introduit les données expérimentales d'AMOCO dans notre méthode d'estimation exprimée dans l'eq.(35), nous avons utilisé la période optimale de $T = 251$ et nous avons estimé différentes valeurs de $k_S \in [0, 20]$. Ces résultats sont présentés dans ce graphique où nous avons les données réelles en noir et les différentes estimations pour $k_S \in [0, 20]$ en rouge.

Nous pouvons apprécier que malgré la simplicité du modèle MS1 l'estimation finale du substrat $\hat{S}(t)$ est étonnamment bonne. Au cours du temps, notre estimation arrive à reproduire les tendances marquées par les données réelles. Nous pouvons noter aussi que dans la partie temporelle final après 70 jours l'estimation n'est plus bonne, d'ailleurs ces données ont été enlevés de l'estimation car il sont chaotiques (voir section données). Il n'est pas évident de déterminer quelle est la k_S optimal dans la graphe, mais nous verrons plus clairement ce qui passe dans la subsection suivante.

Nous pouvons conclure que ce modèle imite le comportement réel du substrat et il est facile de l'interpréter à cause de sa simplicité.

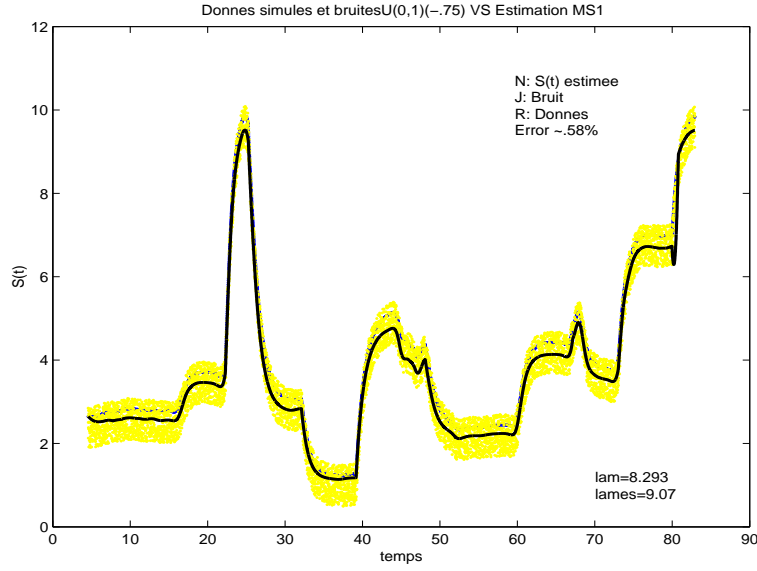


FIG. 12 –

2.3.4 Analyse des Résultats

Nous avons déjà fait la remarque dans la section antérieure que notre méthode d'estimation à partir de l'éq.(35) équivaut à faire une régression linéaire simple. Ainsi nous avons intérêt à regarder le coefficient de corrélation R^2 de la régression linéaire, qui est défini comme suit [Feller 1968]:

$$R^2 = \frac{\sum_i (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2},$$

où $\hat{y}_i = \hat{S}_i$ est la sortie estimé, $y_i = S_i$ est la donnée réelle à chaque instant i , et $\bar{y} = \bar{S}$ est la moyenne de l'ensemble des données réelles. Ce coefficient R^2 nous permettra savoir, environ, quelle est le pourcentage expliqué pour la droite de régression à partir de l'ensemble des données disponibles.

Maintenant, nous pouvons regarder le comportement correspondant du coefficient R^2 pour chaque k_S . Voici le graphe qui nous présente le comportement de R^2 pour différentes valeurs $k_S \in [0, 20]$:

D'abord nous pouvons voir pour l'exemple avec $k_S = 7$, que nous avons une $R^2 = 0.283$. Cela veut dire que la droite de régression nous explique en 28.3 per cent le comportement des données. Il est évident qu'au fur et à mesure que la constante de saturation k_S est plus

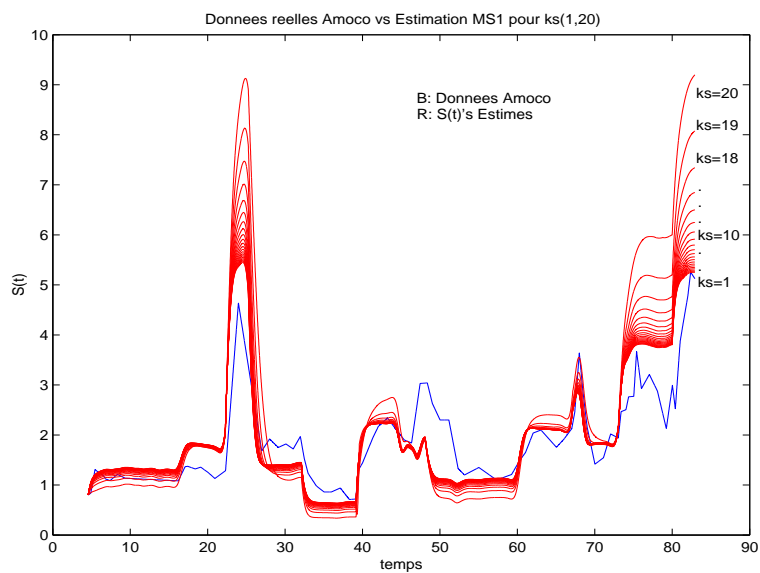


FIG. 13 –

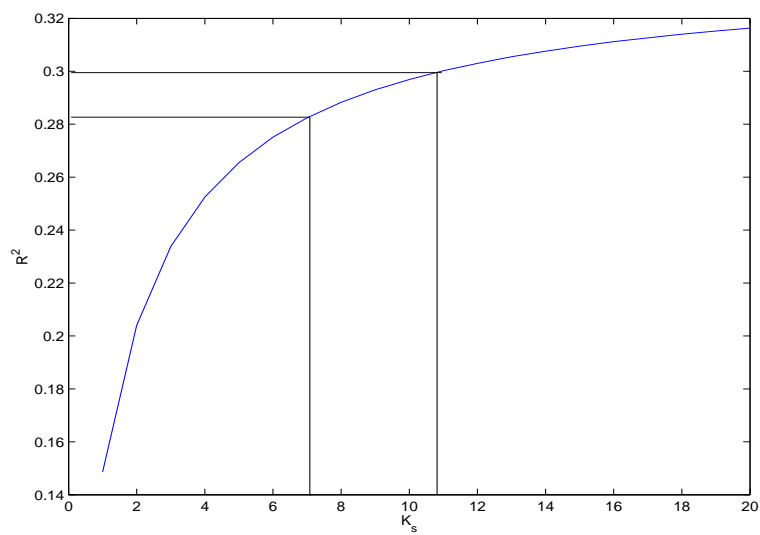


FIG. 14 –

grande le coefficient R^2 devient plus grand, mais à un certain moment, à peu près à $k_S = 20$ le $R^2 = .317$ devient constant. Cette conclusion est logique biologiquement, car quand nous avons un k_S très grande en relation au substrat S , le taux de croissance eq.(3) dépend en grand partie de la grandeur de k_S et non des données en S , alors quand nous faisons une estimation avec les mêmes données S , mais en changeant le k_S il arrive un moment où l'information apportée par les données n'apporte rien de plus, c'est pour cela qu'il se stabilise à partir d'un certain k_S . En suivant ce raisonnement, nous pouvons conclure que l'intervalle de k_S raisonnable pour les données AMOCO est compris entre $k_S \in [6, 20]$, ce qui nous donne $R^2 \in [.27, .31]$.

2.4 Modèle simplifié MS2

D'après la conclusion du modèle MS1, maintenant plus que jamais, nous sommes intéressées par le comportement de k_S ; afin de l'étudier, nous enlèverons l'hypothèse du modèle antérieur, où il est supposé connu. Ainsi, en supposant les deux premières hypothèses du modèle MS1 et en enlevant la troisième où k_S était fixe nous avons le système:

$$\dot{S} = D(S_{in} - S) - \lambda \frac{S}{S + k_S}, \quad (MS2)$$

avec les entrées u , la sortie y , la condition initiale ξ_0 et θ le vecteur des paramètres:

$$u = \begin{pmatrix} D \\ S_{in} \end{pmatrix}, y = (S), \theta = \begin{pmatrix} \lambda \\ k_S \end{pmatrix}, \xi_0 = (S_0).$$

Nous verrons si le système antérieur, MS2, est structurellement identifiable pour le vecteur θ . Nous utiliserons la méthode de la dérivée successive de la sortie afin d'accomplir notre but. Ainsi, nous prenons la sortie:

$$y = h(\xi, t, u, \theta) = S,$$

et nous faisons les dérivées successives jusqu'à que l'on puisse démontrer que le jeu de paramètres θ a une solution unique pour chaque paramètre. Nous ferons notre analyse dans un point $t = 0$. Nous évaluerons la première dérivée de la sortie en ce point, c'est à dire:

$$y(\dot{0}) = S(\dot{0}) = D(0)(S_{in}(0) - S(0)) - \lambda \frac{S(0)}{S(0) + k_S},$$

et, nous prendrons la deuxième dérivée évaluée en $t = 0$ avec le changement de variable $\beta = \frac{S(0)}{S(0) + k_S}$ i.e.:

$$y(\ddot{0}) = S(\ddot{0}) = -D(0)S(\dot{0}) - \lambda \frac{S(\dot{0})}{S(0)} \beta (1 - \beta),$$

a partir de laquelle il est évident que le vecteur $\theta = (\lambda, k_S)$ a une solution unique pour chacun des paramètres, alors le modèle est s.g.i..

Maintenant nous pouvons simplifier notre équation MS2 de la manière suivante:

$$(S + k_S)\dot{S} = DS_{in}S - DS^2 + k_S(DS_{in} - DS) - \lambda S$$

et nous pouvons regrouper l'équation antérieur en trois parties bien définies:

$$S\dot{S} + DS^2 - DS_{in}S - k_S(DS_{in} - DS - \dot{S}) + \lambda S = 0, \quad (38)$$

cette équation présente le grand avantage d'être linéaire par rapport aux deux paramètres k_S et λ . Nous pouvons dans ce cas effectuer la régression linéaire multiple, ce qui nous facilitera

l'interprétation.

Afin de faciliter notre calcul et en suivant les démarches faites dans le modèle antérieur nous ferons l'intégral de l'équation différentielle eq.(38), dans l'intervalle $[t - T, t]$ et en prenant la moyenne, nous avons l'équation déjà réduite:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{T} \left(\frac{S^2(t) - S^2(t - T)}{2} - \int_{t-T}^t D(\tau)(S_{in}(\tau)S(\tau) - S^2(\tau))d\tau \right) \\ & - \frac{1}{T} \left(k_S \left([S(t) - S(t - T)] + \int_{t-T}^t D(\tau)(S_{in}(\tau) - S(\tau))d\tau \right) + \lambda \int_{t-T}^t S(\tau)d\tau \right) = 0, \quad (39) \end{aligned}$$

nous avons converti l'eq.(38) en une équation ou à partir des données expérimentales, nous connaissons toute l'information à chaque instant t et nous pouvons la re-écrire de cette manière réduite:

$$A(t) - k_S B(t) + \lambda C(t) = 0. \quad (40)$$

Grâce à sa linéarité dans les paramètres la fonction objective $J(\theta)$ à minimiser est:

$$\operatorname{argmin}(J(\lambda, k_S)) = \operatorname{argmin} \left(\sum_i [A(t_i) - k_S B(t_i) + \lambda C(t_i)]^2 \right) \quad (41)$$

Encore une fois la minimisation de la fonction objective (41) équivaut à faire une régression linéaire multiple.

2.4.1 Résultats pour MS2

En suivant la démarche décrite dans la section des résultats pour MS1, nous avons réalisé le programme Matlab correspondant. Nous avons vérifié la validité du modèle à partir des simulations sans bruit et grâce aux simulations avec bruit nous avons regardé l'identifiabilité pratique du modèle.

2.4.2 Résultats du programme en simulation pour MS2

Nous avons simulé des données à partir du modèle MS2 en prenant des valeurs initiales issues de la littérature [Bernard 2001], après nous avons mise en marche notre méthode d'estimation en utilisant l'eq. (41). Puis nous avons effectué deux comparaisons: la première ponctuellement en comparant le paramètre θ avec le paramètre estimé $\hat{\theta}$ et la deuxième avec la mesure de l'erreur relative en utilisant l'eq.(37) dans la section précédente.

Le graphique suivant nous présente la sortie estimé $\hat{y} = \hat{S}(t)$ en noir versus la sortie simulée $y = S(t)$ en jaune interligne:

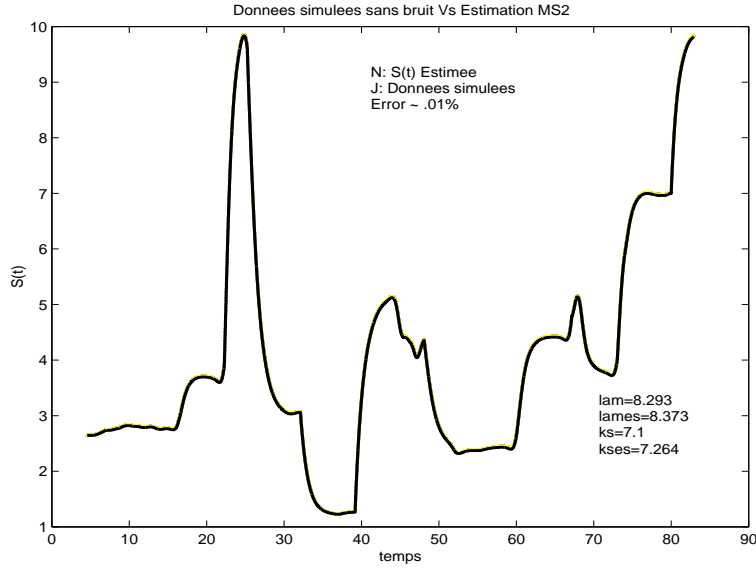


FIG. 15 –

Nous avons trouvé que l'estimation ponctuelle est similaire: pour le premier paramètre: $\lambda = 8.293 \simeq \hat{\lambda} = 8.373$ et pour le deuxième paramètre: $k_s = 7.1 \simeq \hat{k}_s = 7.264$, ainsi nous pouvons apprécier que la sortie estimée et la sortie simulée se suivent pratiquement parfaitement au cours du temps. L'erreur relative de .01 % est basse. Alors nous pouvons conclure que l'estimation du paramètre $\hat{\theta}$ est légèrement biaisé, mais le biais est d'origine numérique. Ainsi, nous avons retrouvé le paramètre que nous avons mis dès le début dans la simulation. Alors notre modèle et le programme correspondant marchent correctement.

Maintenant nous verrons la sensibilité du modèle si nous bruitons les données simulées. Le premier sort de bruit sera normal de moyenne nulle et espérance unitaire i.e. $N(0,1)$. Dans le graphique suivant nous présentons: $\hat{y} = \hat{S}(t)$ en noir, $y = S(t)$ en bleu interligne et le bruit normal avec des points en jaune:

Nous pouvons constater que l'estimation ponctuelle est différente $\lambda = 8.293$ versus $\hat{\lambda} = 4.82$ et $k_s = 7.1$ versus $k_s = 6.2$ avec une erreur relative de 30 % très haute en comparaison au bruit introduit. C'est à dire que nous avons tout de suite dépassé notre limite de 5 per cent que nous avons introduit pour estimer si le modèle est identifiable. Nous avons essayé avec les mêmes bruits que dans la section précédente, en obtenant des résultats

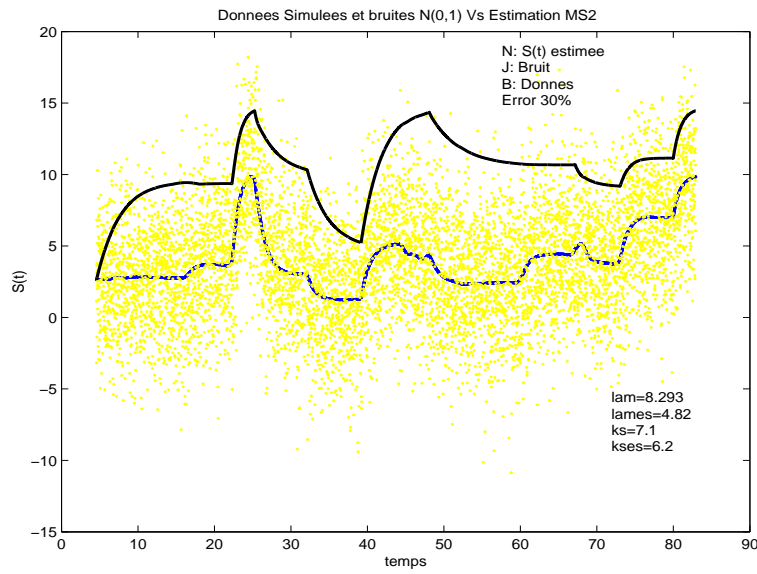


FIG. 16 –

similaires.

Ainsi nous pouvons dire que même si notre système MS2 est s.g.i comme nous avons prouvé, en pratique avec des données bruitées il n'est en pratique pas identifiable, car nous obtenons des valeurs différentes du paramètre θ introduit que celle du paramètre estimé $\hat{\theta}$ avec des bruits relativement petits.

Sachant que le système MS2 n'est pas en pratique identifiable, nous arrêterons ici notre analyse de ce modèle, car nous n'obtiendrons pas plus d'informations sur le procédé que celles que nous avons obtenues avec MS1.

2.5 Modèle MX

Un des plus grands problèmes que posent les données réelles, dans ce cas et en général pour la digestion anaérobie, est que nous ne connaissons aucune information sur la biomasse X , pour cette raison les modèles à deux variables comme dans le cas du modèle de départ, M1, deviennent très difficile à résoudre. La principale raison est la non-identifiabilité structurelle du système, dans notre cas la raison peut s'expliquer par la manque de connaissances en X . Ainsi, nous avons tourné le problème en proposant le modèle MX qui se base sur l'estimation du vecteur X et une fois que nous le connaissons, nous estimons notre vecteur des paramètres θ . Voici le modèle:

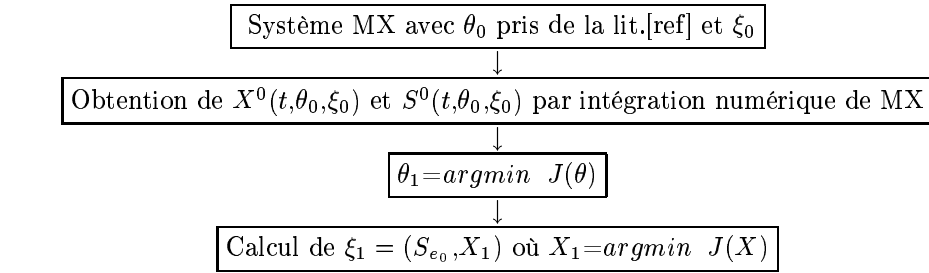
$$MX \begin{cases} \frac{ds}{dt} &= \dot{S} &= D(S_{in} - S) - k\mu(S)X \\ \frac{dx}{dt} &= \dot{X} &= \mu(S)X - DX \end{cases}$$

avec

$$u = \begin{pmatrix} D \\ S_{in} \end{pmatrix}, y = \begin{pmatrix} S \\ X \end{pmatrix}, \theta = \begin{pmatrix} k \\ \mu_{mx} \\ k_s \end{pmatrix}, \xi_0 = \begin{pmatrix} S_0 \\ X_0 \end{pmatrix},$$

Nous pouvons noter que la seule différence avec le modèle M1 est la sortie y en incluant le vecteur X qui est obtenu a priori. Cette différence va nous permettre d'avoir un système qui est s.g.i, résultat obtenu avec le programme Identifiability tests [Sedoglavic 2001].

Voici la démarche générale à suivre: Nous prenons le système MX, avec la condition initiale suivante $\xi_0 = (S_0, X_0)$ où $S_0 = S_{e_0}$ issu des données expérimentales S_e et $X_0 = X_{eq}$ issu de la condition initiale à l'équilibre du système MX. Nous détaillerons les deux premières phases. Ainsi la première phase:



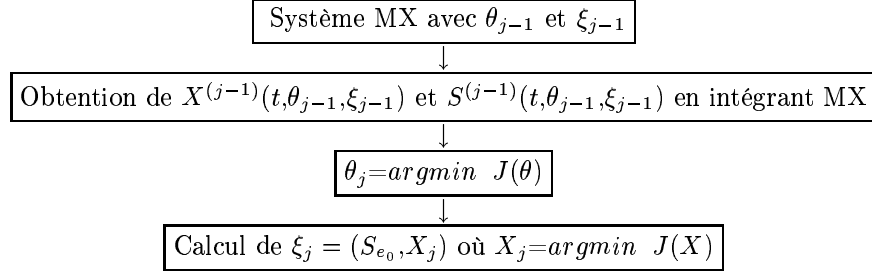
où

$$J(\theta) = \sum_i \left(\frac{S_i^0(t, \theta, \xi_0) - S_{e_i}}{S_{e_i}} \right)^2$$

et

$$J(X) = \sum_i \left(\frac{S_i^0(t, \theta_1, S_{e_0}, X) - S_{e_i}}{S_{e_i}} \right)^2.$$

Ainsi la phase j sera:



où:

$$J(\theta) = \sum_i \left(\frac{S_i^{(j-1)}(t, \theta, \xi_{j-1}) - S_{e_i}}{S_{e_i}} \right)^2$$

et

$$J(X) = \sum_i \left(\frac{S_i^{(j-1)}(t, \theta_j, S_{e_0}, X) - S_{e_i}}{S_{e_i}} \right)^2.$$

Nous répétons les phases successivement jusqu'à que le vecteur X converge. Finalement nous trouverons, $\hat{\theta}$, notre vecteur de paramètres unique.

2.5.1 Résultats pour MX

En suivant la même démarche présentée dans les sections résultats, nous avons réalisé le programme Matlab correspondant. Malheureusement, le temps de calcul est long et les résultats ne sont pas satisfaisants, car nous n'arrivons pas encore à vérifier la validité du modèle MX à partir des simulations, même sans bruit. Les raisons possibles pourraient être:

- Le problème de convergence du vecteur X .
- Le problème des minimums locaux à cause de la dimension du vecteur θ .
- Problèmes d'Identifiabilité pratique.

2.6 Modèles alternatifs

Dans cette section nous présenterons différents modèles que nous avons suggérés, mais il ne sont pas implémentés en Matlab et il manque une analyse de ceux ci.

Modèle simplifié MSX Ce modèle présente une alternative au modèle MS1, il considère les mêmes hypothèses de ce modèle sauf celle du X , où nous avons pris X comme une valeur moyenne; ici nous la relaxerons en prenant l'intégrale sur X que nous verrons dans le paragraphe suivant.

Afin de l'obtenir, nous prenons le modèle de base M1, eq.(2). D'abord nous intégrons la deuxième équation du système M1 entre 0 et t en obtenant:

$$X(t) = e^{x_0} e^{\int_0^t \left(\frac{S(\tau)}{S(\tau) + k_S} - D(\tau) \right) d\tau},$$

en renommant la deuxième exponentielle $M(t)$, et en substituant cette équation pour $X(t)$ dans l'équation (2), ainsi nous obtenons le système différentielle :

$$\dot{S} = D(S_{in} - S) - \kappa \frac{S}{S + k_S} e^{M(t)}, \quad (MSX)$$

où $\kappa = k\mu_{mx}e^{x_0}$ et nous avons les entrées u , la sortie y , la condition initiale ξ_0 et θ le vecteur des paramètres:

$$u = \begin{pmatrix} D \\ S_{in} \end{pmatrix}, y = (S), \theta = (\kappa), \xi_0 = (S_0).$$

De la même façon que nous avons démontré pour MS1, ce système, MSX, est s.g.i. pour κ .

Modèles basés dans les modèles antérieurs Cette section a pour but de présenter les différents changements que nous pouvons essayer pour acquérir plus d'information sur notre bioprocédé. Alors, sur la base de nos modèles M1, MS1, MS2, MX, MSX nous pouvons les convertir avec les variations suivantes:

- Changement du vecteur des sorties y .
- Changement du vecteur des paramètres: supposer quelques uns connus .
- Essayer d'autres méthodes d'estimation (voir section méthodes d'estimation) tant pour les conditions initiales ξ_0 , que pour le vecteur de paramètres θ .
- Essayer d'autres méthodes d'estimation pour la fonction à minimiser $J(\theta)$

Évidemment ces changements entraînent une nouvelle analyse de l'identifiabilité du système. Une fois cette analyse faite, nous devons comparer les résultats, avantages et désavantages des changements internes au modèle eux même, pour après passer à la comparaison entre les différents modèles, si possible.

Conclusion

L'estimation des paramètres est un problème délicat. Il faut bien recueillir les données, choisir une méthode d'estimation correcte, choisir une méthode de minimisation robuste et surtout penser à la cohérence de ces éléments avec le modèle dynamique.

Nous avons constaté que le procédé biochimique des bactéries anaérobie en chimostat n'est surtout pas facile à modéliser et à analyser. La raison principale est qu'il devient très complexe. Même dans des modèles simples ou simplifiés, des problèmes apparaissent à l'oeil: problèmes de dimension de paramètres, d'optimisation et de temps de calcul et précision informatique.

Malgré les difficultés pratiques, nous avons pu valider les modèles MS1, MS2 et MX, en trouvant des relations et caractéristiques importantes de certains paramètres et des conditions initiales. Dans le cas du MS1 nous avons réussi à comparer avec des données réelles en obtenant des résultats très proches de la réalité.

Nous sommes convaincus que à travers de l'analyse des modèles simples, nous pouvons arriver à comprendre l'information précieuse cachée dans les paramètres d'une modèle différentiel. Le travail restant à faire se fera surtout dans cette voie: Essayer des modèles simples, puis, les compliquer progressivement, sans perdre la clarté, et finalement les analyser. Ainsi nous connaissons de plus en plus notre bioprocédé. Le but final sera de trouver une démarche générale à suivre pour l'estimation des paramètres d'un système différentiel du type bioréacteur.

Acknowledgments: This work has been carrying out with the support provided by the European commission, Information Society Technologies program, Key action I Systems & Services for the Citizen, contract TELEMAT number IST-2000- 28256. This information is provided under the sole responsibility of the author and does not necessarily represent the opinion of the European Commission, which is not responsible for any use that might be made of it.

Références

- [Andrews 1968] J. Andrews. *A mathematical model for the continuous culture*, Biotechnol.and Bioeng., vol. 10., 1968.
- [Bastin 1990] G. Bastin, D. Dochain. *On-line estimation and adaptive control of bioreactors*, Elsevier Science Publishing Co., Amsterdam, 1990.
- [Bernard 2001] O. Bernard, D. Dochain. et al. *Dynamical Model Development an Parameter Identification for an Anaerobic Wasterwater Treatment Process* , John Wiley and Sons, 2001.
- [Dochain 2001] D. Dochain et al. *Automatique des bioprocédés*, Hermes. Systèmes Automatisés, p. 30-50, 2001.
- [Faurre 1994] P. Faurre,M. Robin. *Eléments d'automatique*, Dunod, Paris, 1994.
- [Feller 1968] W. Feller *Introduction to Probability Theory and Its Applications*, Vol. 1, 3rd ed. New York: Wiley, 1968.
- [Fossard 1993] A. Fossard,D. Normand. *Systèmes non linéaires*, Masson, Paris, 1993.
- [Koch 1999] K. Koch.
Parameter Estimation and Hypothesis Testing in Linear Models, Springer, New York, 1999.
- [Monod 1935] J. Monod. *Le taux de croissance des bactéries*, Scientific Academy, London, 1935. .
- [Mood 1983] A. Mood. *Introduction to the Theory of Statistics* , New York: McGraw-Hill, 1983.
- [Murray 1999] J. Murray. *Mathematical Biology*, Springer, Berlin, 1999.
- [Sedoglavic 2001] A. Sedoglavic. *Méthodes seminumériques en algèbre différentielle*, Ecole Polytechnique, Paris, 2001.
- [Telemac 2003] Projet européen *Telemonitoring and advanced telecontrol and high yield wastewater treatment plants*,www.ercim.org/telemac.
- [Walter 1997] E. Walter,L. Pronzato. *Identification of Parametric Models*, Springer, New York, 1997.
- [West 1999] M. West. *Bayesian Forecasting and Dynamic Models*, Springer, London, 1999.



Unité de recherche INRIA Sophia Antipolis
2004, route des Lucioles - BP 93 - 06902 Sophia Antipolis Cedex (France)

Unité de recherche INRIA Futurs : Parc Club Orsay Université - ZAC des Vignes
4, rue Jacques Monod - 91893 ORSAY Cedex (France)

Unité de recherche INRIA Lorraine : LORIA, Technopôle de Nancy-Brabois - Campus scientifique
615, rue du Jardin Botanique - BP 101 - 54602 Villers-lès-Nancy Cedex (France)

Unité de recherche INRIA Rennes : IRISA, Campus universitaire de Beaulieu - 35042 Rennes Cedex (France)

Unité de recherche INRIA Rhône-Alpes : 655, avenue de l'Europe - 38334 Montbonnot Saint-Ismier (France)

Unité de recherche INRIA Rocquencourt : Domaine de Voluceau - Rocquencourt - BP 105 - 78153 Le Chesnay Cedex (France)

Éditeur
INRIA - Domaine de Voluceau - Rocquencourt, BP 105 - 78153 Le Chesnay Cedex (France)
<http://www.inria.fr>
ISSN 0249-0803